

I- Description thermodynamique d'un système physico chimique

- **Grandeurs de réaction** : définition /Cas de la fonction $\Delta_r G$; relation avec les potentiels chimiques
- Grandeurs standard de réaction : définition /influence de T , approximation d'Ellingham / relations entre $\Delta_r X^\circ$
- Grandeurs standard de réaction tabulées : $\Delta_f H^\circ$, $\Delta_{diss} H^\circ$, règle de Hess
- Calculs de $\Delta_r H^\circ$, cycles thermodynamiques

II- Structure de la matière - modèle quantique de l'atome

Structure de l'atome - les pre- requis

- Composition sommaire de l'atome : noyau + électrons , grandeurs caractéristiques

Symbole d'un élément chimique : A , Z / Isotopes , abondances isotopiques

Transformation nucléaires

- Spectre d'émission de H

- Détermination des OA dans le cadre de la mécanique quantique

densité de probabilité de présence

Résultats pour l'atome d'hydrogène , nombres quantiques (n , l , m) , expression générale sous la forme $R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, expression de l'énergie , E(n) /notions de couches et de sous couches

Résultats pour les espèces hydrogénoïdes

Résultats pour les atomes polyélectroniques : **approximation orbitale** (Z_{eff}) , E (n , l)

Notion de rayon d'une orbitale , fonction densité radiale de probabilité de présence

Notion de région nodale , de phase , de plans de symétrie et d'antisymétrie .

Représentations conventionnelles des OA s et p

Programme PC 2^{ème} année :

Notions et contenus	Capacités exigibles
Identités thermodynamiques ; potentiel chimique. Entropie, entropie molaire standard absolue. Enthalpie libre.	Écrire les identités thermodynamiques pour les fonctions U , H et G . Distinguer et justifier le caractère intensif ou extensif des grandeurs physiques utilisées. Interpréter qualitativement une variation d'entropie en termes de nombre de micro-états accessibles.
Potentiel chimique dans le cas modèle des gaz parfaits : $\mu_i = \mu_i^\circ(T) + RT \ln(p_i/p^\circ)$ Potentiel chimique $\mu_i = \mu_{i,ref} + RT \ln a_i$ dans les cas modèles de : - espèces chimiques en phase condensée en mélange idéal ; - solutés infiniment dilués. Influence de la pression sur $\mu_{i,ref}$ pour des espèces en phase condensée.	Établir l'expression du potentiel chimique dans le cas modèle des gaz parfaits purs. Utiliser le potentiel chimique pour prévoir l'évolution d'un système contenant une espèce chimique dans plusieurs phases. Exprimer l'enthalpie libre d'un système chimique en fonction des potentiels chimiques. Déterminer une variation d'enthalpie libre, d'enthalpie et d'entropie entre deux états du système chimique.
Enthalpie de réaction, entropie de réaction, enthalpie libre de réaction ; grandeurs standard associées.	Justifier qualitativement ou prévoir le signe de l'entropie standard de réaction.

	Déterminer une grandeur standard de réaction à l'aide de données thermodynamiques et de la loi de Hess.
Notions et continus	Capacités exigibles
Fonctions d'onde électroniques ψ de l'atome d'hydrogène. Nombres quantiques n, l, ml, ms. Énergie et rayon associés à une fonction d'onde.	Interpréter $ \psi ^2$ comme la densité de probabilité de présence d'un électron en un point et la relier à la densité de charge. Prévoir qualitativement, pour l'atome d'hydrogène et les ions hydrogénoïdes, l'évolution du rayon et de l'énergie associés à une fonction d'onde en fonction du nombre quantique principal.
Orbitales des atomes polyélectroniques, représentation schématique. Configuration électronique d'un atome et d'un ion monoatomique. Électrons de cœur et de valence.	Dessiner l'allure des orbitales atomiques s et p. Établir la configuration électronique d'un atome ou d'un ion à l'état fondamental. Déterminer le nombre d'électrons non appariés d'un atome dans son état fondamental